

**БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ**

**Факультет прикладной математики и информатики**

**Кафедра дискретной математики и алгоритмики**

Аннотация к дипломной работе

**«Оптимизация пространственной структуры моделей белок-  
белковых комплексов»**

Хадарович Анна Юрьевна

Научный руководитель — доктор физ.-мат. наук, профессор  
кафедры дискретной математики и алгоритмики Тузиков А.В.

2015

## Реферат

Дипломная работа, 42 страницы, 23 рисунка, 20 источников.

БЕЛОК-БЕЛКОВЫЕ КОМПЛЕКСЫ, ДОКИНГ, АЛГОРИТМЫ  
ПРЕДСКАЗАНИЯ, СТРУКТУРА, МОДЕЛИРОВАНИЕ.

*Объект исследования* – белок-белковые комплексы, меры их схожести.

*Цель работы* – разработка и тестирование меры функциональной схожести между белок-белковыми комплексами для использования её в совокупности с пространственными мерами для нахождения наиболее подходящего шаблона при сравнительном моделировании.

Методами исследования являлись изучение литературы по данному вопросу, поиск и создание средств и инструментов для извлечения информации о белках из баз данных, статистические методы оценки качества построенной меры.

Результатом является разработанная мера функциональной схожести между белок-белковыми комплексами, которая в сочетании с существующей пространственной мерой позволяет улучшить качество отбора шаблонов при проведении сравнительного моделирования.

Данный алгоритм может с успехом применяться в области сравнительного моделирования белок-белковых комплексов.

## **Abstract**

Diploma thesis, 42 pages, 23 figures, 20 sources.

**PROTEIN-PROTEIN COMPLEXES, DOCKING, PREDICTION  
ALGORITHMS, STRUCTURE, MODELING.**

*Object of research* – protein-protein complexes and measures of their similarity.

*Purpose* – development and testing the measure of the functional similarity between the protein-protein complexes to use it in the conjunction with spatial measures for finding the most appropriate template in comparative modeling.

Method of research was the review of the literature on the subject, the search and creation of tools and instruments to extract information about proteins from appropriate databases, statistical methods for assessing the quality of the constructed measure.

The result is a measure of functional similarity between the protein-protein complexes was developed, which can improve the quality of the selection of templates for comparative modeling in combination with existing spatial measures.

This algorithm can be successfully applied in the field of comparative modeling of protein-protein complexes.